

ANALISA PENGARUH PERIODIK *CHARGING* DAN *DISCHARGING* PADA WAKTU *CHARGING* DAN *DISCHARGING* DARI METAL *HYDRIDE REACTOR (MHR)*

Taurista Perdana Syawitri

Teknik Mesin Universitas Muhammadiyah Surakarta
Jl. A. Yani Tromol Pos I Pabelan, Kartasura

e-mail: ristam52@gmail.com

ABSTRAK

Perpindahan panas merupakan faktor penting yang mempengaruhi kinerja tangki penyimpanan hydrogen dalam bentuk metal hydride. Penelitian sebelumnya menyimpulkan bahwa penambahan sejumlah kecil metal foam pada interior metal hydride reactor (MHR) merupakan cara yang efektif untuk meningkatkan perpindahan panas pada reaktor, sehingga mengurangi waktu charging. Namun, proses charging dan discharging MHR dilakukan secara terpisah dalam studi ini. Oleh karena itu, penelitian ini menyimulasikan model 2-D axisymmetric menggunakan software COMSOL untuk menginvestigasi pengaruh dari periodik charging dan discharging dari MHR yang mengandung metal foam dengan fraksi volume tertentu. Hasil simulasi menunjukkan bahwa model saat ini mempunyai hasil yang sesuai dengan hasil yang ditunjukkan di dalam literatur. Selain itu, ditemukan bahwa terdapat nilai optimum dari fraksi volume metal foam di setiap proses charging dan proses discharging yang memberikan waktu charging dan discharging lebih pendek.

Kata kunci: *penyimpanan hidrogen, metal-hydride reactor, metal foam, periodik charging dan discharging*

PENDAHULUAN

Kekhawatiran terhadap berkurangnya bahan bakar fosil di dunia dan pengaruh buruk dari emisi gas rumah kaca telah mendorong pencarian terhadap sumber energi alternatif. Di antara berbagai sumber energi alternatif yang tersedia, bahan bakar hidrogen telah menarik perhatian khusus karena mempunyai nilai kalori yang tinggi, tidak mempunyai pengaruh buruk terhadap lingkungan, dan kemudahan produksi dari berbagai sumber energi terbarukan. Akan tetapi, penyimpanan hidrogen masih menjadi masalah yang signifikan (Forde, dkk, 2009).

Hidrogen dapat disimpan dalam berbagai cara, antara lain sebagai gas yang dikompresi di dalam tangki bertekanan tinggi, sebagai cairan di dalam tangki kriogenik, atau sebagai unsur yang diserap di dalam bahan

padat seperti *metal hydride* pada *porous tanks* (Zhang, dkk, 2005). Penyimpanan hydrogen dengan menggunakan metode yang terakhir merupakan metode yang menjanjikan dikarenakan mempunyai *volumetric energy density* yang tinggi dan lebih aman karena mempunyai tekanan *charging* yang relatif rendah (Jiao, dkk, 2012). Namun, proses *charging*, *discharging* dan pendistribusian panas selama proses *charging* dan *discharging* meninggalkan masalah karena *metal hydride* memiliki efektif konduktivitas panas yang rendah dan nilai entalpi yang tinggi dari proses adsorpsi/desorpsi H₂.

Banyak penelitian telah menunjukkan bahwa kinerja sebuah MHR sangat tergantung pada kondisi operasi (misalnya, suhu fluida perpindahan panas (Gopal & Murthy, 1992 & 1995) dan tekanan di bagian *exit* reaktor)

dan efisiensi dari *thermal management* (misalnya, peningkatan konduktivitas termal (Choi & Mills, 1990 dan Mellouli, dkk, 2009)). Penelitian sebelumnya (Tsai, 2011) melakukan investigasi numerik pada kinerja sebuah MHR yang mengandung *metal foam* dengan menggunakan *self-written numerical code*. Hasil studi ini menunjukkan bahwa *metal foam* memberikan peningkatan yang efektif terhadap perpindahan panas di dalam reaktor, sehingga mengurangi waktu *charging*. Selain itu, hasil dari penelitian ini juga menunjukkan bahwa dengan mengurangi tekanan keluar dari MHR sebagai fungsi dari waktu, *steadiness* dari debit hydrogen saat keluar dari reaktor dapat ditingkatkan. Akan tetapi, dalam penelitian ini, proses *charging* dan *discharging* dilakukan secara terpisah. Artinya, parameter yang digunakan dalam menganalisis proses *charging* berbeda dengan yang digunakan dalam menganalisis proses *discharging*.

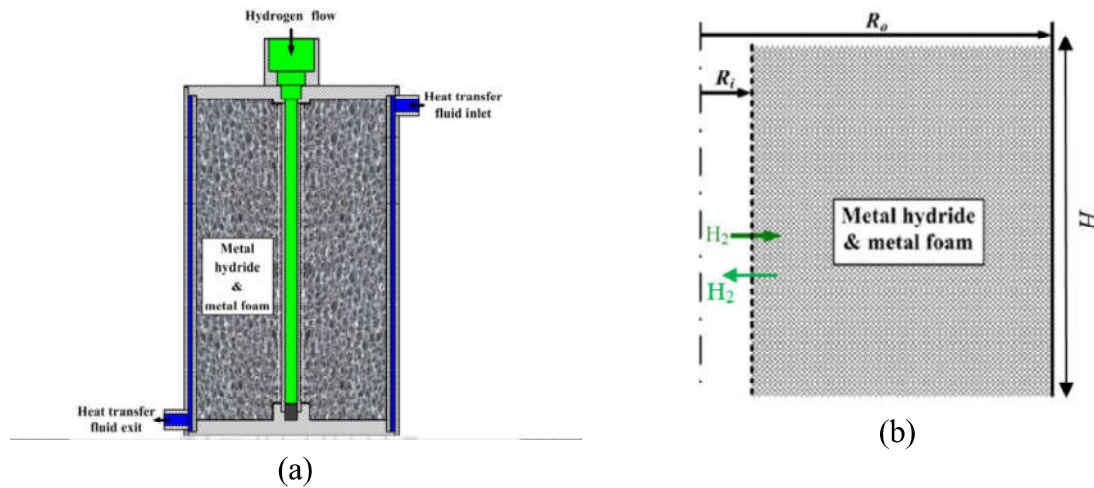
Dengan demikian, penelitian ini melakukan simulasi COMSOL berdasarkan model *2-D axisymmetric* untuk menyelidiki pengaruh dari periodik *charging* dan *discharging* terhadap kinerja sebuah MHR yang mengandung *metal foam* dengan fraksi volume tertentu. Dalam melakukan simulasi, proses *charging* dilakukan hingga hydrogen dalam MHR mencapai 95% dari kapasitas maksimum penyimpanan hydrogen dari MHR. Selanjutnya, proses *discharging* dilakukan hingga hydrogen di MHR tersisa 10% dari kapasitas maksimum penyimpanan hydrogen dari MHR. Proses ini dilakukan dengan cara ini selama empat siklus.

Simulasi ini didasarkan pada tiga model COMSOL yang terpisah, yaitu *heat*

transfer in porous media, *Darcy's law*, dan *the transport of diluted species in chemical species transport*. Hasil yang diperoleh dari simulasi COMSOL dibandingkan dengan hasil eksperimen dan numerik pada literatur. Pengaruh dari periodik *charging* dan *discharging* pada waktu *charging* dan *discharging* juga ditunjukkan dan dianalisis sebagai fungsi dari persentase *metal foam*.

MODEL MATEMATIKA

Gambar 1(a) menunjukkan ilustrasi skematik dari MHR yang digunakan dalam penelitian ini. Gambar 1(b) menunjukkan model *2-D axisymmetric* dan dimensi yang terkait. Perlu diingat bahwa sebagai akibat dari *axisymmetric radial*, model ini hanya mempertimbangkan dimensi setengah dari tangki. Model matematika yang digunakan dalam penelitian ini diambil dari model matematika Jemni-Ben Nasrallah (JBN) (Jemni dan Nasrallah, 1995). Fraksi volume dari *metal foam* dilambangkan sebagai ϕ_{mf} , sehingga fraksi volume serbuk *metal hydride* di MHR sama dengan $(1-\phi_{mf})$. Dengan demikian, serbuk *metal hydride* dihitung sebagai $(1-\phi_{mf})(1-\varepsilon)$ dari volume MHR, dimana ε adalah porositas dari serbuk *metal hydride*, sedangkan gas hydrogen menempati $(1-\phi_{mf})\varepsilon$ dari total volume MHR. Model ini juga mengabaikan perubahan volume serbuk *metal hydride* dan mengasumsikan porositas dari serbuk *metal hydride* memiliki nilai konstan $\varepsilon = 0,55$ [11] (Perhatikan bahwa semua nilai parameter tercantum dalam Tabel 1).



Gambar 1 – (a) Skema dari MHR berbentuk silinder yang mengandung *metal foam*; (b) Model sederhana 2-D axisymmetric.

Tabel 1 – Daftar dari nilai semua parameter

MHR	
Ambient fluid temperature, T_f	298 K
Charging pressure, p_{ch}	10 bar
Discharging pressure, p_d	0.1 bar
Effective heat transfer coefficient, h	1652 W/m ² -K
Initial temperature, T_0	298 K
Internal radius, R_o	5 cm
Height, H	5 mm
Hydrogen	
Atomic weight, M_H	1 kg/kmol
Ideal gas constant, R_g	4.16 kJ/kg-K
Kinetics viscosity, ν_g	1.05 x 10 ⁻⁴ m ² /sec
Specific heat capacity, $c_{p,g}$	14.27 kJ/kg-K
Thermal conductivity, k_g	0.190 W/m-K
Metal Hydride (LaNi₅)	
Density (bulk), ρ_M	8310 kg/m ³
Molecular weight, M_M	432.4 kg/kmol
Particle diameter, d_s	30 μ m
Porosity, ε	0.55
Saturated density, ρ_{ss}	8416 kg/m ³
Specific heat capacity $c_{p,s}$	0.419 kJ/kg-K
Thermal conductivity, k_s	0.222 W/m-K
Permeability, κ_s	4.1 μ m ²
Hydrogen desorption kinetics	
Activation energy, E_d	8240 kJ/kg
Heat release, ΔH°	1.5 x 10 ⁴ kJ/kg

Reaction rate constant, C_d		9.57 sec ⁻¹
Reference temperature, T_{ref}		303 K
Scaled enthalpy difference, $\Delta H/R_g$		-3324 K
Desorption Coefficients		
a_0, a_1	0.420605	-4.11352
a_2, a_3	14.1799	-13.1085
a_4, a_5	4.55729	0.165833
a_6, a_7	-0.5923	0.178977
a_8, a_9	-0.023008	0.00112613
Metal foam (aluminum)		
Density (bulk), ρ_{mf}		2700 kg/m ³
Specific heat capacity $c_{p,mf}$		0.963 kJ/kg-K
Thermal conductivity, k_{mf}		121.1 W/m-K
Hydrogen absorption kinetics		
Activation energy, E_a		21180 kJ/kg
Heat release, ΔH°		1.5 x 10 ⁴ kJ/kg
Reaction rate constant, C_a		59.19 sec ⁻¹
Reference temperature, T_{ref}		303 K
Scaled enthalpy difference, $\Delta H/R_g$		-3594 K
Absorption Coefficients		
a_0, a_1		-0.34863 10.1059
a_2, a_3		-14.2442 10.3535
a_4, a_5		-4.20646 0.962371
a_6, a_7		-0.115468 0.00563776

Initial dan Boundary Condition

Pada simulasi ini, temperatur awal T_o diatur menjadi 298°C dan tekanan awal p_o diatur menjadi 0.1 bar. Tekanan ekuilibrium awal p_{eq} juga diatur 0.1 bar (gas hidrogen di dalam MHR berada pada kondisi ekuilibrium dengan *metal hydride* saat proses *charging*). Rasio dari atom hidrogen terhadap atom metal H/M dihitung dari persamaan kesetimbangan tekanan dan fungsi polynomial pada JBN model (Jemni dan Nasrallah, 1995) yaitu 0.05.

Untuk mengatur *thermal boundary conditions*, model ini mengabaikan perpindahan panas dengan bagian luar MHR pada dinding bawah ($z = 0$) dan dinding atas ($z = H$). Dengan kata lain,

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial z}(r, H, t) &= 0 \quad (R_i \leq r \leq R_o, t > 0), \\ \frac{\partial T}{\partial z}(r, 0, t) &= 0 \quad (R_i \leq r \leq R_o, t > 0). \end{aligned} \quad (1)$$

Pada dinding sisi kanan ($r = R_o$), perpindahan panas secara konveksi dengan *ambient fluid* diperhitungkan, sehingga *thermal boundary condition* pada sisi ini adalah

$$k_e \frac{\partial T}{\partial r}(R_o, z, t) = h[T_f - T(R_o, z, t)] \quad (0 \leq z \leq H, t > 0) \quad (2)$$

Untuk dinding sisi kiri MHR, dimana aliran hidrogen keluar dan masuk MHR, perpindahan panas diabaikan karena laju

aliran yang relatif rendah. Oleh karena itu, *thermal boundary condition* diatur sebagai

$$(R_i, z, t) = 0 \quad (0 \leq z \leq H, t > 0). \quad (3)$$

Berkaitan dengan *mechanical boundary conditions*, komponen normal dari kecepatan hidrogen pada dinding sisi kanan, bawah dan atas MHR diatur menjadi nol karena kondisi lingkungan yang *impermeable* pada dinding MHR. Selanjutnya, tekanan hidrogen pada dinding sisi kiri MHR diatur sama dengan tekanan *charging/discharging* karena aliran hidrogen keluar dan masuk MHR pada dinding ini. Dengan kata lain, dari persamaan Darcy's Law pada JBN model, *pressure boundary conditions* diekspresikan sebagai

$$\frac{\partial p}{\partial z}(r, H, t) = 0 \quad (R_i \leq r \leq R_o, t > 0), \quad (4)$$

$$\left. \frac{\partial p}{\partial r}(R_o, z, t) = 0 \quad (0 \leq z \leq H, t > 0) \right| \quad (5)$$

$$\frac{\partial p}{\partial z}(r, 0, t) = 0 \quad (R_i \leq r \leq R_o, t > 0), \quad (6)$$

$$\frac{\partial p}{\partial r}(R_i, z, t) = p_{ch}, p_d \quad (7)$$

$$(0 \leq z \leq H, t > 0).$$

METODE NUMERIK

Semua persamaan diselesaikan dengan menggunakan tiga model pada COMSOL, yaitu *Darcy's law for fluid flow in porous media and subsurface flow*, *heat transfer in porous media* dan *transport of diluted species in chemical species transport*. Dikarekan COMSOL hanya memberikan nilai konsentrasi (c), persamaan tambahan perlu ditambahkan pada simulasi sehingga nilai laju aliran massa dari hidrogen dapat diketahui.

Transport of diluted species in chemical species memberikan persamaan

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_i \nabla c_i) = R_i, N_i = -D_i \nabla c_i. \quad (8)$$

Nilai konsentrasi yang diberikan COMSOL berhubungan dengan H/M pada model JBN. Dengan kata lain, konsentrasi diekspresikan

sebagai jumlah mol dari atom hidrogen per unit volume. Oleh karena itu, c dapat diekspresikan sebagai

$$c = (1 - \varphi_{mf})(1 - \varepsilon)\rho_s \frac{1}{M_M M}. \quad (9)$$

dimana ρ_s adalah nilai yang tidak diketahui. Persamaan (9) dapat ditulis kembali sebagai

$$\frac{H}{M} = \frac{c M_M}{(1 - \varphi_{mf})(1 - \varepsilon)\rho_s}. \quad (10)$$

Substitusi persamaan (10) pada persamaan massa jenis $\rho_s(r, z, t)$ dari serbuk *metal hydride* memberikan

$$\rho_s = \rho_M + \rho_M M_H \frac{c}{(1 - \varphi_{mf})(1 - \varepsilon)\rho_s} \quad (11)$$

Dengan menata ulang dan menyelesaikan persamaan (11), massa jenis dari *metal hydride*, ρ_s dapat dihitung dengan

$$\rho_s = \frac{\rho_M + \sqrt{\rho_M^2 + \frac{4\rho_M M_H c}{(1 - \varphi_{mf})(1 - \varepsilon)}}}{2} \quad (12)$$

Substitusi persamaan (24) pada persamaan kesetimbangan massa dari gas hydrogen pada JBN model memberikan

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{(1 - \varphi_{mf})(1 - \varepsilon)}{\rho_M M_H} [2\rho_s - \rho_M] \frac{\partial \rho_s}{\partial t} \quad (13)$$

dimana langkah terakhir, substitusi persamaan (13) pada persamaan (8) dan atur *diffusion coefficient* sama dengan nol (i.e., $D = 0$) menghasilkan

$$R_i = -\frac{(1 - \varphi_{mf})[2\rho_s - \rho_M]}{\rho_M M_H} \dot{m} \quad (14)$$

Hydrogen absorption/desorption rate dapat dihitung dengan menggunakan persamaan (9)~(14) dan persamaan laju absorpsi (Jemni dan Nasrallah, 1995) dan laju desorpsi (Jemni dan Nasrallah, 1995) pada JBN model.

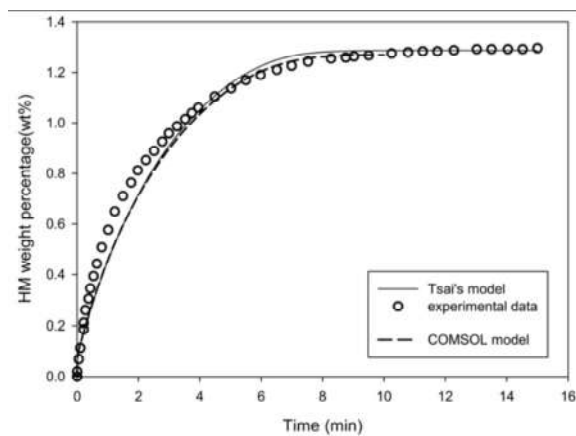
Dalam melakukan simulasi, pembuatan meshing pada interior MHR diatur menggunakan grid yang sama yaitu 0.0005 m. *Time step* dan *relative error* diatur masing-

masing sebagai 0.01 detik dan 0.0001. (Perlu diingat bahwa semua pengaturan ini didapat dari tes *grid-independence* terlebih dahulu).

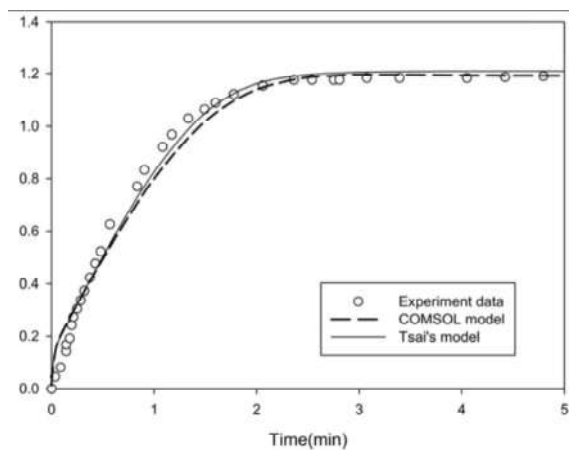
HASIL DAN DISKUSI

Validasi model

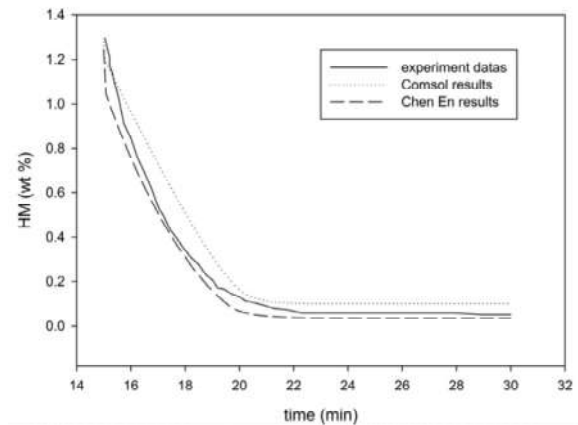
Hasil yang diperoleh dari simulasi COMSOL telah divalidasi melalui perbandingan dengan data eksperimen yang diperoleh oleh Laurencelle dan Goyette (Laurencelle dan Goyette, 2007) untuk proses absorpsi dan desorpsi hidrogen. Hasil simulasi juga dibandingkan dengan hasil simulasi numerik yang dilakukan oleh Tsai (Tsai, 2011) untuk proses absorpsi dan Li (Li, 2011) untuk proses desorpsi.



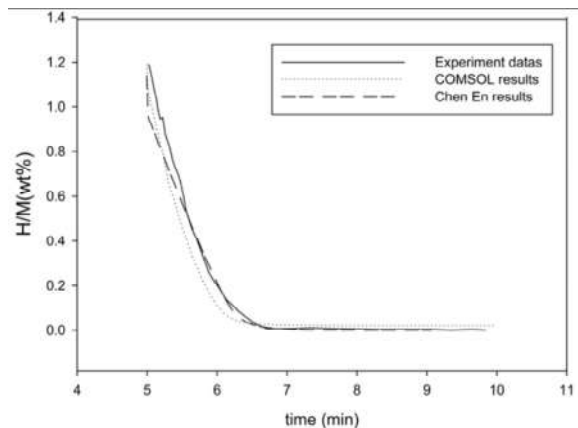
(a)



(b)



(c)



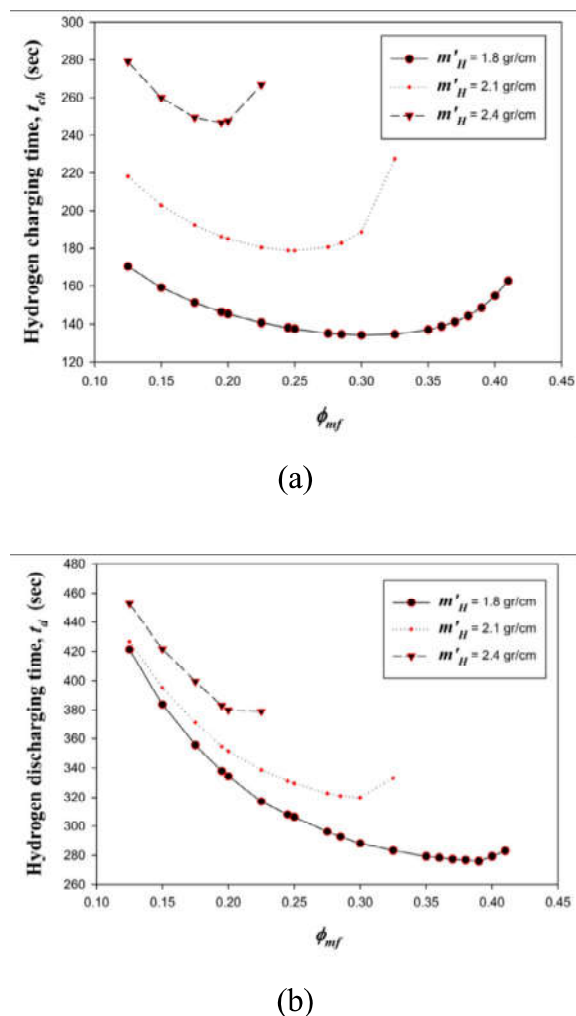
(d)

Gambar 2 – Perbandingan data eksperimen dari Laurencelle dan Goyette (Laurencelle dan Goyette, 2007), hasil numerik sebelumnya (Tsai, 2011 dan Li, 2011) dan hasil COMSOL untuk: (a) absorpsi dalam reaktor kecil, (b) absorpsi dalam reaktor besar, (c) desorpsi dalam reaktor kecil dan (d) desorpsi dalam reaktor besar.

Gambar 2(a) dan (b) menunjukkan variasi temporal persentase berat metal hydride ($wt\%$) selama proses absorpsi masing-masing dalam reaktor kecil dan besar. Gambar 2(c) dan (d) menunjukkan parameter yang sama untuk proses desorpsi. Keempat gambar menunjukkan bahwa hasil COMSOL mempunyai hasil yang sesuai dengan data eksperimen. Selain itu, hasil COMSOL juga mempunyai hasil yang sesuai dengan hasil numerik Tsai (Tsai, 2011) untuk absorpsi (lihat Gambar 2(a) dan (b)) dan hasil

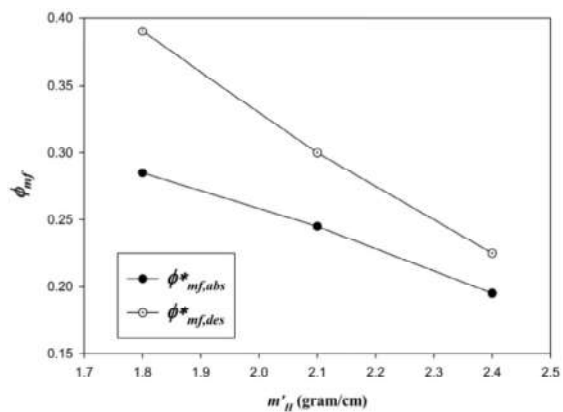
numerik Li (Li, 2011) untuk desorpsi (lihat Gambar 2(c) dan (d)). Perlu diingat bahwa koefisien perpindahan panas yang digunakan dalam memperoleh hasil COMSOL yang ditunjukkan pada Gambar 2, yaitu $h = 500 \text{ W/m}^2\text{K}$, lebih rendah dari yang ditentukan dalam Tabel 1. Hal ini dikarenakan dalam percobaan Laurencelle dan Goyette, MHR dipanaskan dalam oven melalui lapisan udara, sedangkan model digunakan dalam penelitian ini (dan pada Tsai, 2011 dan Li, 2011) dipanaskan dalam bak air).

Pengaruh dari metal foam terhadap waktu charging dan discharging



Gambar 3 – Perubahan (a) waktu *charging* hidrogen dan (b) waktu *discharging* hidrogen terhadap fraksi volume *metal foam*, ϕ_{mf} sebagai fungsi dari massa hidrogen, m'_H , per satuan tinggi reaktor.

Gambar 3(a) dan (b) menunjukkan variasi waktu *charging* hidrogen dan waktu *discharging* hidrogen terhadap fraksi volume *metal foam* sebagai fungsi dari massa hidrogen (m'_H) per satuan tinggi reaktor. (Perlu dicatat bahwa kedua gambar memperlihatkan siklus kedua dari periodik *charging* dan *discharging*). Kedua gambar menunjukkan bahwa kedua proses *charging* dan proses *discharging*, masing-masing mempunyai nilai optimum dari fraksi volume *metal foam* yang memberikan waktu *charging/discharging* paling cepat pada setiap massa hidrogen yang telah ditentukan. Kedua gambar juga menunjukkan bahwa nilai optimum dari fraksi volume *metal foam* berkurang seiring dengan meningkatnya massa hidrogen. Hal ini dikarenakan dengan semakin meningkatnya massa hidrogen, maka ruang yang tersisa untuk menyimpan *metal foam* akan berkurang.



Gambar 4 – Variasi nilai optimal dari fraksi volume *metal foam* untuk proses *charging* dan proses *discharging*, ϕ_{mf} , terhadap massa hidrogen yang tersimpan di dalam MHR.

Gambar 4 menunjukkan variasi nilai optimal dari fraksi volume *metal foam* pada proses *charging* dan *discharging* terhadap massa hidrogen yang tersimpan dalam MHR. Seperti ditunjukkan pada gambar, dengan meningkatnya massa hidrogen, nilai optimal dari fraksi volume *metal foam* pada proses *charging* dengan *discharging* mendekati satu sama lain. Akan tetapi, untuk setiap massa hidrogen yang diberikan, terdapat dua nilai

optimal dari fraksi volume yang berbeda (yaitu, satu nilai untuk proses *charging* dan nilai kedua untuk proses *discharging*). Oleh karena itu, dalam aplikasi di dunia nyata, perancang MHR harus memilih rata-rata dari dua nilai optimal fraksi volume *metal foam* untuk memaksimalkan kinerja MHR.

KESIMPULAN

Penelitian ini telah melakukan simulasi COMSOL untuk menyelidiki pengaruh dari periodik *charging* dan *discharging* terhadap kinerja MHR yang mengandung *metal foam*. Hasil penelitian menunjukkan bahwa hasil simulasi yang diperoleh untuk absorpsi dan desorpsi mempunyai hasil yang sesuai baik dengan data eksperimen (Laurencelle dan Goyette, 2007) maupun data numerik (Tsai, 2011 dan Li, 2011) yang disajikan dalam literatur. Penelitian ini menunjukkan bahwa untuk massa hidrogen tertentu, terdapat dua nilai optimal yang berbeda dari fraksi volume

metal foam untuk masing-masing proses *charging* dan *discharging*. Perbedaan antara dua nilai ini berkurang dengan semakin meningkatnya massa dari hidrogen. Oleh karena itu, dalam aplikasi di dunia nyata, perancang MHR harus memilih rata-rata dari dua nilai optimal fraksi volume *metal foam* untuk memaksimalkan kinerja MHR.

Penelitian ini telah mempresentasikan pendekatan baru untuk menghubungkan persamaan dasar pada COMSOL yaitu pada model *transport of diluted species in chemical species transport* dengan persamaan keseimbangan massa hidrogen untuk serbuk *metal hydride* dalam model JBN. Secara umum, hasil yang disajikan dalam penelitian ini telah mengkonfirmasi bahwa model yang baru memberikan hasil yang berguna untuk pengembangan desain MHR lebih lanjut dan mengevaluasi kinerja MHRs yang mengandung *metal foam*.

DAFTAR PUSTAKA

- A. Jemni and S. B. Nasrallah, International Journal of Hydrogen Energy, 20, 881 (1995).
 A. Jemni and S. B. Nasrallah, International Journal of Hydrogen Energy, 20, 43 (1995).
 C-E Li, Master Thesis, National Cheng Kung University (2011).
 F. Laurencelle and J. Goyette, International Journal of Hydrogen Energy, 32, 2957 (2007).
 H. Choi, A.F. Mills, International Journal of Heat and Mass Transfer, 33, 1281 (1990).
 J. Zhang, T.S. Fisher, P.V. Ramachandran, J.P. Gore, I. Mudawar, Journal of Heat Transfer, 127, 1391 (2005).
 K. Jiao, X. Li, Yan Yin, Y. Zhou, S. Yu, Qing Du, Applied Energy, 94, 257 (2012).
 M-L Tsai, PhD Thesis, National Cheng Kung University (2011).
 M.R. Gopal, S.S. Murthy, International Journal of Hydrogen Energy, 17, 795 (1992).
 M.R. Gopal, S.S. Murthy, International Journal of Hydrogen Energy, 20, 911 (1995).
 T. Forde, E. Naess, V.A. Yartys, International Journal of Hydrogen Energy, 34, 5121 (2009).
 S. Mellouli, H. Dhaou, F. Askri, A. Jemni, S. B. Nasrallah, International Journal of Hydrogen Energy, 34, 9343 (2009).